

Abstract for the general public in Polish

Nadprzewodnik jest materiałem, który poniżej określonej temperatury, nazywanej temperaturą krytyczną, wykazuje pewne charakterystyczne właściwości. Po pierwsze, cechuje się zerowym oporem elektrycznym, ponadto jest idealnym diamagnetykiem. Pierwszy nadprzewodnik, odkryty w 1911 roku przez Kamerlingha Onnesa, charakteryzował się wyjątkowo niską temperaturą krytyczną, przekraczającą zero absolutne zaledwie o kilka stopni. Od tego odkrycia naukowcy marzyli o nadprzewodnictwie w temperaturze pokojowej, jednak uzyskanie wyższej temperatury krytycznej okazało się niezwykle wyzwaniem. Pomimo licznych osiągnięć (i kilku nagród Nobla) na przestrzeni lat, znane jeszcze do niedawna materiały wymagałyby chłodzenia ciekłym helem lub ciekłym azotem. Nadprzewodnik działający w temperaturze pokojowej mógłby zrewolucjonizować znaną technologię. Nadprzewodnikowa sieć energetyczna wykluczyłaby straty energii związane z oporem, a więc przyniosłaby ogromne oszczędności w porównaniu z technologią, którą dysponujemy obecnie.

Niedawne odkrycie materiałów bogatych w wodór, które wykazują właściwości nadprzewodzące powyżej temperatury 200 K, wydawało się bardzo perspektywiczne. Wspomniane układy dwuskładnikowe (łącznie wodór z cięższymi pierwiastkami), mimo że pozwoliły na ustanowienie nowego rekordu temperatury krytycznej, wymagają zastosowania bardzo wysokiego ciśnienia, co ogranicza możliwości ich wykorzystania na skalę przemysłową. Ponadto, na chwilę obecną substancje te zostały już na tyle szczegółowo przebadane, że coraz mniej prawdopodobne wydaje się dokonanie przełomowego odkrycia bez zmiany podejścia.

Obiecujące wydaje się najnowsze odkrycie, wskazujące na istnienie fazy nadprzewodzącej w temperaturze 288 K w układzie składającym się z wodoru, węgla i siarki. Co prawda związek ten nadal wymaga wysokiego ciśnienia metalizacji, natomiast być może wskazuje bardziej perspektywiczny kierunek dalszych badań.

W związku z powyższym, celem projektu jest przebadanie właściwości nadprzewodzących układów trójskładnikowych w poszukiwaniu materiału wykazującego lepsze cechy niż dotychczas znane substancje. Zakładamy, że wprowadzenie dodatkowych elektronów do znanych już bogatych w wodór układów dwuskładnikowych pozwoli na poprawę ich parametrów i umożliwi znalezienie nadprzewodników o wyższej temperaturze krytycznej przy niższym niż dotychczas ciśnieniu. Strategia ta jest powiązana z faktem, iż fononowa gęstość stanów dwuskładnikowych wodorków składa się z odseparowanych obszarów – regionu drgań o niskich częstotliwościach powiązanych z atomami ciężkich pierwiastków oraz obszaru wysokich częstotliwości pochodzących od drgań atomów wodoru. Dodanie trzeciego składnika o pośredniej masie może poskutkować wypełnieniem luki w fononowej gęstości stanów, a tym samym istotnie zmienić właściwości nadprzewodzące układu.

Do zakresu badań należy znalezienie stabilnych struktur o składzie S-X-H, La-X-H i Y-X-H, w których X oznacza lekkie pierwiastki z bloku p (C, B, N, Al, Si, P). Następnie przeprowadzone zostaną obliczenia dotyczące właściwości elektronowych, fononowych, dynamiki sieci i sprzężenia elektron-fonon przy wykorzystaniu metod DFT i DFPT zaimplementowanych w pakiecie Quantum Espresso. Dokładna analiza właściwości stanu nadprzewodzącego (w szczególności temperatura krytyczna, nadprzewodząca przerwa energetyczna, termodynamiczne pole krytyczne, czy ciepło właściwe) zostanie wykonana w ramach teorii Migdała-Eliashberga, uwzględniającej efekty silnosprężeniowe charakterystyczne dla wysokotemperaturowych nadprzewodników. Spośród wszystkich przeanalizowanych teoretycznie nadprzewodników najbardziej obiecujące układy zostaną poddane eksperymentowi weryfikacyjnemu.

Wyniki badań przeprowadzonych w ramach projektu w dużym stopniu poszerzą aktualny stan wiedzy na temat nadprzewodnictwa w nieznanych dotąd układach trójskładnikowych, natomiast najbardziej pożądanym efektem jest odkrycie nadprzewodnika w warunkach normalnych, czyli Świętego Graala fizyki ciała stałego. Należy podkreślić, że technologia bazująca na nadprzewodnikach wywarła istotny wpływ na realizację szeroko zakrojonych badań podstawowych z uwagi na możliwości zastosowań komercyjnych, które jak dotąd są w dużej mierze niewykorzystane.